研究者を目指したきっかけ

若　者

福　島　鉄　也*

The event that let to me start research

Key Words：Research, Trigger, Motivation

はじめに

幸運にも「生産と技術」に寄稿する機会を頂いたので、著者が研究の世界に身を置くことになったきっかけと、研究活動を振り返りつつ現在行っている研究内容を簡単に紹介したいと思う。著者は東京大学物性研究所に在籍しており第一原理計算を用いてスピントロニクス・磁性材料を対象に物質設計（マテリアルデザイン）を行っている研究者の一人である。未だ若輩者であり稚拙な記事であるが研究職を志している大学生諸君、またこれから理系を選択し大学への進学を考えている中学・高校生の生徒諸君がこの記事を読み何か得られることがあれば幸いである。

研究者を目指したきっかけ

まず、著者が研究者（アカデミックの道）を目指したきっかけはまったく大層なものではなく、むしろ不純である。小学生のころからなぜか数学と理科を好む傾向があったが、研究者になろうという高尚な志を持っていたわけでもない。「将来どのような仕事に就けばいいのか？」、「父親の仕事を継ぐことになるのか？」とか若者によくある漠然とした不安を抱えながら、明確な目的もなく近畿大学理学部数学物理学科物理学コースへの進学に至った。

今でもよく覚えているが、研究者を目指そうと思ったのは近畿大学在学中のある講義に出席していたときである。その講義が格段に興味深かったわけではなく、ふと講義中に大学の教員は講義以外の時間はまったく自由なのではないか？という思いが頭をよぎった。今思えば非常に世間知らずで失礼極まりない発想である。実際、大学の教員は教育と研究に加え各種委員会への参加や入試業務等が山積みで自由な時間などほとんど存在しない。勉強自体は好きであったため、そのような生活は楽しそうだなと勝手に思いこみ研究者になるため真剣に座学に取り組んだ。

学部4年生では理論物理研究室への配属が決まったが、この研究室配属も著者にとって非常に幸運であったと思う。教授から大学院入試に対するアドバイスや勉強と研究の違いなど研究者を目指すのに重要なことを丁寧に教えて頂いた。当研究室では位相幾何学を中心に理論物理の研究を行っており全国的に見てもかなり特殊であった。トポロジー、ホモロジー、ホモトピー等のあまり馴染みがない言葉が次から次へとでてきて、これは物理の研究に役に立つのか？という疑問が湧き出てきた。もちろん、これは著者の知識が浅すぎて重要性を認識できなかっただけである。結局、他の大学院に進学することになり、研究テーマを第一原理計算によるマテリアルデザインに変更することになる。しかし、現在（2020年）はトポロジカル絶縁体を代表に位相幾何学に基づいた研究が非常に活発に行われている。どんな国内・国外の会議に出席してもトポロジーと言う言葉が回りから聞こえてくる状況である。そのまま、位相幾何学の研究を中心に継続していたのなら、また異なった研究生活を送っていたのかな？と思いを馳せることも少なくはない。後悔しているわけではないが、流行の研究ばかりを追っていてはだめだということを自戒し教訓としている。いずれにしろ、

* Tetsuya FUKUSHIMA
1980年1月生まれ
大阪大学大学院理学研究科物理学専攻
博士後期課程
現在、東京大学　物性研究所
特任准教授　博士（理学）
専門／第一原理計算　マテリアルデザイン
TEL：04-7136-3279
FAX：04-7136-3279
E-mail：fuku@issp.u-tokyo.ac.jp

その時に学んだ数学の素養は現在の研究に非常に役に立っている。

大学院での研究

近畿大学を卒業した後、大阪大学大学院理学研究科物理学専攻へ進学した。配属先の研究室は第一原理計算を用いた電子状態計算を中心に、金属、半導体、スピントロニクス、磁性、超伝導等の幅広い材料を扱うこれまたユニークな研究室であった。当時、ムーアの法則に沿ったコンピューター性能の向上は著しく目を見張るものがあり、2002年に国産スーパーコンピュータ「地球シミュレータ」が演算性能約36TFLOPSを記録し見事世界ランキングTOP500で一位になったのを鮮明に覚えている。このような情勢の中、大規模計算機を用いた第一原理計算による物性解析とデザインは実験や材料開発において非常に重要だと認識されていた。

学生の自主性を重んじる非常に自由な環境の下、色々な材料の電子状態計算を実行することで、多くの知識と技術を習得することができた。既に商用の第一原理計算パッケージが世間に出回っており単純な周期系に対する研究は多く行われていたため、博士前期・後期課程の大部分は磁性原子を含む不純物系や合金の電子状態と磁気特性の解析、そして不規則性を有する新奇スピントロニクス材料のデザインに焦点をあて研究を遂行した。ブロッホの定理が満たされていない不規則系の電子状態計算は一般の電子状態計算手法では困難を伴うため、KKRグリーン関数法とコヒーレントポテンシャル近似を組み合わせた特殊な計算手法を用いて研究を行った。第一原理計算の業界では認知度の低い手法であるのだが、著者は現在もこの手法を積極的に用いることで、他研究者が立ち入ることのできない領域で独自のマテリアルデザインを実行できている。

良い上司、先輩、後輩にも恵まれ非常に有意義な大学院生活をおくることができた。振り返ってみると、学部の頃は楽そうだなと思って研究職を目指していたのが、単純に研究がおもしろくて本気で研究者になろうと決心したのは大学院在学中であり、当時お世話になった方々には感謝の念を禁じ得ない。

計算機マテリアルデザイン

著者の学生時代を振り返ってきたが、ここで現在携わっている研究（計算機マテリアルデザイン）についてごく簡単に述べたいと思う。物質のデザインは物質構造が与えられ物性機能を解明する一般的なシミュレーションの逆問題であるため極めて困難を伴う。なぜなら、膨大な量の自由度の中から目的とする機能を発現する最適なマテリアルの構成原子種と原子構造配置を見つける必要があるからである。我々はこのような問題を直接的に解く代わりに、計算機マテリアルデザインエンジンと呼ばれる材料開発環境を用いて逐次的に逆問題を解くことを提案している（図1参照）。計算機マテリアルデザインエンジンでは、まず原子・ナノスケールサイズの微視的世界の基本法則である量子力学と統計力学に基づいた量子シミュレーション（第一原理計算）により材料の物性を系統的に調べ物理的・化学的機構を解明し、これらを統合・定量化することで仮想的に新機能物質を予測する。予測した仮想物質は量子シミュレーションに基づいて機能を検証し、目的とする機能を実現できない場合はその微視的原因を解明することで、さらに優れた新機能物質のデザインと実験による検証を行う。このデザインエンジンを巡回することで、従来の絨毯爆撃的な材料開発に比べ、よりスマートにデザイン主導で新機能物質を予測することが可能になり材料開発速度を格段に向上させシームレス化を行うことが可能になる。第一原理計算手法の詳細やデザインの成功例に興味がある読者は是非参考文献に目を通して頂きたい[1,2]。

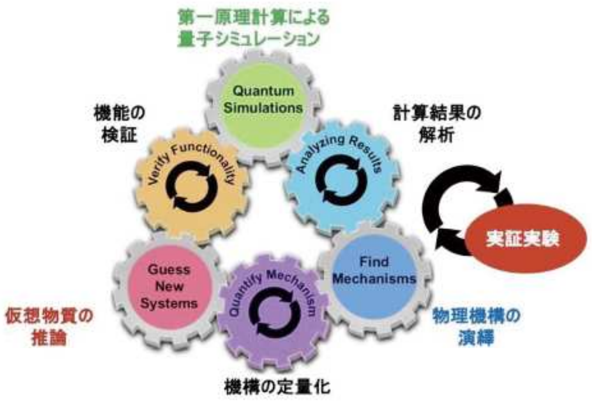

図1：計算機マテリアルデザイン

おわりに

「若者」というコラムを執筆するに当たり、どのような内容にするか悩んだのであるが、研究内容の

詳細をだらだらと書くよりは著者が研究者を目指すことになったきっかけについて記述することにした。著者は執筆時点で既に40歳になっており研究以外の業務に忙殺されることが多いが研究者であることを後悔したことはない。少子化による大学運営費の削減、また現在（2020年）猛威を奮っているCOVID-19の影響による基礎研究に対する科学研究費の削減等、楽観できる状況ではまったくないが、やはり研究を行っている時は楽しい。

どのような職業であってもやりがいはあると思うが、研究職という仕事は世界を変える可能性を秘めており、人生を費やす価値がある。「きっかけ」、「動機」はなんでもよい、研究者を志している10代、20代の若者が世界に雄飛するのを期待したい。

参考文献

1) K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudrnovský, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki, and R. Zeller, Rev. Mod. Phys. **82**, 1633, (2010).
2) T. Dietl, K. Sato, T. Fukushima, A. Bonanni, M. Jamet, A. Barski, S. Kuroda, M. Tanaka, Pham Nam Hai, and H. Katayama-Yoshida, Rev. Mod. Phys. **87**, 1311, (2015).